

計算精度を制御できる数値ラプラス逆変換法

大高 真人* 松本 忠*

A Method for Numerical Inversion of Laplace Transforms with Accuracy Control

Masato OHTAKA and Tadashi MATSUMOTO

(Received Aug. 29, 1997)

This paper describes an accurate method for numerical inversion of Laplace transforms. This method employs the Fourier series approximation and can control its numerical accuracy by deriving the numerical errors (the theoretical approximation error, the truncation error and the canceling error) directly from given $F(s)$. The performance difference among three approximation equations of the method are discussed in detail.

High accuracy numerical calculation methods for single time point including the iterative method for ultra high accuracy and high speed method for numerous time points using FFT are presented with numerical examples.

Key Words : Numerical Method, Inverse Laplace Transforms, Fourier Series Approximation

1. ま え が き

ラプラス変換は、電気工学のみならず理工学一般に広く用いられている計算法である。しかし、時間関数から周波数関数への正変換は容易であるが、周波数領域で合成された周波数関数を時間関数に変換する逆変換は、一般には、かなり困難である。このため、逆変換過程を数値計算で行なう数値ラプラス逆変換が試みられている。

ラプラス変換は次式で定義される。

$$F(s) = \int_0^{\infty} f(t) e^{-st} dt \quad (1)$$

$$f(t) = (1/2\pi i) \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} F(s) e^{st} ds \quad (2)$$

ここで、 $s=a+i\infty$ 、 $a>\alpha_1$ (α_1 : 収束座標) である。

* 電子工学科

数値逆変換には、(I) 式(2)を直接数値積分する、(II) $f(t)$ あるいは $F(s)$ を直交多項式で展開し、展開係数を求める問題に帰着させる^{(1) (2)}、(III) 式(2)の指数項を他の関数で近似し、複素積分により近似式を導く⁽³⁾、等の手法がある。(II)の手法は数学的には興味あるものであり、(III)の手法は数値計算が簡単であるなどの特徴があるが、何れも、適用範囲や計算精度に問題があり、また、誤差の評価・制御が困難である。

本論文では、(I)の手法に属するフーリエ級数展開法を用いる。この手法は、DubnerとAbateによって提案され⁽⁴⁾、その後、近似式の拡張が行なわれている^{(5) (6)}。また、雨谷は数値積分の立場から類似の手法を開発し⁽⁷⁾、細野は(III)に属す導出法を用いて本手法の特別の場合にあたる近似式を得ている^{(8) (9)}。最近、Abateはフーリエ級数展開法全般に関する報告を行っており⁽¹⁰⁾、細野はさらに近似次数の高い近似式を提案している⁽¹¹⁾。

フーリエ級数展開法の長所は、近似式の導出に伴う必然的な誤差（以下、近似誤差と呼ぶ）が、未知関数 $f(t)$ を用いてではあるが、定式化されていることである。短所は、級数和の収束が遅いことであり、従来の検討は収束加速法（FFTの利用^{(4) (5) (6)}、オイラー変換^{(8) (9) (10)}、 δ -アルゴリズム⁽¹⁰⁾、 ε -アルゴリズム^{(6) (11)}等）の適用手法に集中している。近似誤差は、ほとんどの場合、荒い近似による推定値が用いられ、桁落ちによる誤差（以下、桁落ち誤差）の評価はまったく行なわれていない。また、本手法の近似式は三形式あるが、これらの誤差特性の相違は無視されている。

著者らは、すでに、二形式の近似式について、その近似誤差、打ち切り誤差が既知関数 $F(s)$ から求められることを示した⁽¹²⁾。本論文では、より完全な誤差制御を目的として、まず、三形式全ての近似式について近似誤差、打ち切り誤差、桁落ち誤差が十分な計算精度で $F(s)$ から導けることを示し、また、種々の条件下における三つの近似式の誤差特性の相違を明らかにする。次に、これらの結果を用いて、ほぼ完全な誤差評価と制御を行なえる、一時刻に対する高精度計算法と多時刻に対する一括高速計算法を提案し、各計算法における適切な近似式の選別法、各種パラメータの設定法、数値計算手法を明らかにする。

2. ラプラス逆変換のフーリエ級数展開法による近似式

時間関数 $f(t)$ を実関数とし式(2)にフーリエ級数展開法を適用すれば、以下のように近似式及び誤差式が得られる^{(4) - (6)}。

$$f(t) = f_R = f_R^M + E_R^{T-M} - E_R \quad (3a)$$

$$= f_I = f_I^M + E_I^{T-M} - E_I \quad (3b)$$

$$= f_{RI} = f_{RI}^M + E_{RI}^{T-M} - E_{RI} \quad (3c)$$

ここで、 f_* (* = R, I, RI 以下同じ) は各近似式の総称とする。 f_*^M は M 項近似式である。

$$f_R^M = (2e^{at}/T) \sum_{k=0}^{M-1} \text{Re}\{F(a + i\omega_k)\} \cos \omega_k t, \quad 0 < t < T \quad (4a)$$

$$f_I^M = (2e^{at}/T) \sum_{k=0}^{M-1} \text{Im}\{F(a + i\omega_k)\} \sin \omega_k t, \quad 0 < t < T \quad (4b)$$

$$f_{RI}^M = (f_R^M + f_I^M)/2, \quad 0 < t < 2T \quad (4c)$$

ここで、 $\omega_k = k\pi/T$ 、 T はフーリエ級数展開法における近似周期、 Σ' は初項を $(1/2)$ 倍して和を取ることを示す。式(4a)(4b)と式(4c)では定義域が異なっている。 E_* は近似誤差を表わし、次式で

与えられる。

$$E_R = E_1 + E_2 \quad (5a)$$

$$E_I = E_1 - E_2 \quad (5b)$$

$$E_{RI} = E_1 \quad (5c)$$

$$E_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_{1n}, \quad E_{1n} = e^{-2anT} f(2nT + t) \quad (6)$$

$$E_2 = \sum_{n=1}^{\infty} E_{2n}, \quad E_{2n} = e^{-2a(nT-t)} f(2nT + t) \quad (7)$$

$E^{T,M}$ は M 項近似の場合の打ち切り誤差を表わす。

$$E_R^{T,M} = (2e^{at}/T) \sum_{K=M}^{\infty} \operatorname{Re}\{F(a + i\omega_k)\} \cos \omega_k t \quad (8a)$$

$$E_I^{T,M} = (-2e^{at}/T) \sum_{K=M}^{\infty} \operatorname{Im}\{F(a + i\omega_k)\} \sin \omega_k t \quad (8b)$$

$$E_{RI}^{T,M} = (E_R^{T,M} + E_I^{T,M})/2 \quad (8c)$$

桁落ち誤差は $f^{T,M}$ に含まれると考える。

以下において、 $f^{T,M}$ と表した場合は打ち切り誤差の影響を無視できるように ($|E_s| > |E_s^{T,M}|$), $f^{T,M}$ の場合は打ち切り誤差の相対値 $|RE^{T,M}|$ が収束条件 TC より小となる ($|RE^{T,M}| = |E^{T,M}/f(t)| < TC$) ように数値計算を行なうことを意味する。

3. 誤差解析

本節では、三つの近似式について、精度の良い各誤差の評価法とそれに基づく数値計算上のパラメーターの設定法を示す。

3. 1 近似誤差

まず、従来のほとんどの計算法において用いられている、近似誤差の推定法とそれに基づく積分路 $s = a$ の設定法を示す。 $f(t)$ がラプラス変換可能であるための十分条件 $|f(t)| \leq Ae^{\alpha_1 t}$ を満たすと仮定し、さらに $\Delta a = a - \alpha_2$, $\Delta at > 0$, $\Delta aT > 0$, $t < T$ とすれば、

$$|E_R| \cong |E_I| \cong |E_2| \leq Ae^{\alpha_1 t} e^{-2\Delta a(T-t)} \quad (9a)$$

$$|E_{RI}| \cong |E_1| \leq Ae^{\alpha_1 t} e^{-2\Delta aT} \quad (9b)$$

と成り、 $\Delta at \rightarrow$ 大で $|E_s| \rightarrow$ 小、 $t \rightarrow T$ で $|E_{RI}| \rightarrow$ 大なる近似誤差の大域的な特性が得られる。

ここで、 $F(s)$ より求められる α_p ($F(s)$ の最右の極 s_p の実部、 $\alpha_p \leq \alpha_1 \leq \alpha_2$) を用いて α_2 を近似し、且つ、 $|f(t)| \cong Ae^{\alpha_p t}$ と仮定し、 $\Delta a = a - \alpha_p$ と表せば

$$|E_{RI}|/f(t) \cong |E_2/f(t)| \cong e^{-2\Delta a(T-t)} = RE_2^E \quad (10.a)$$

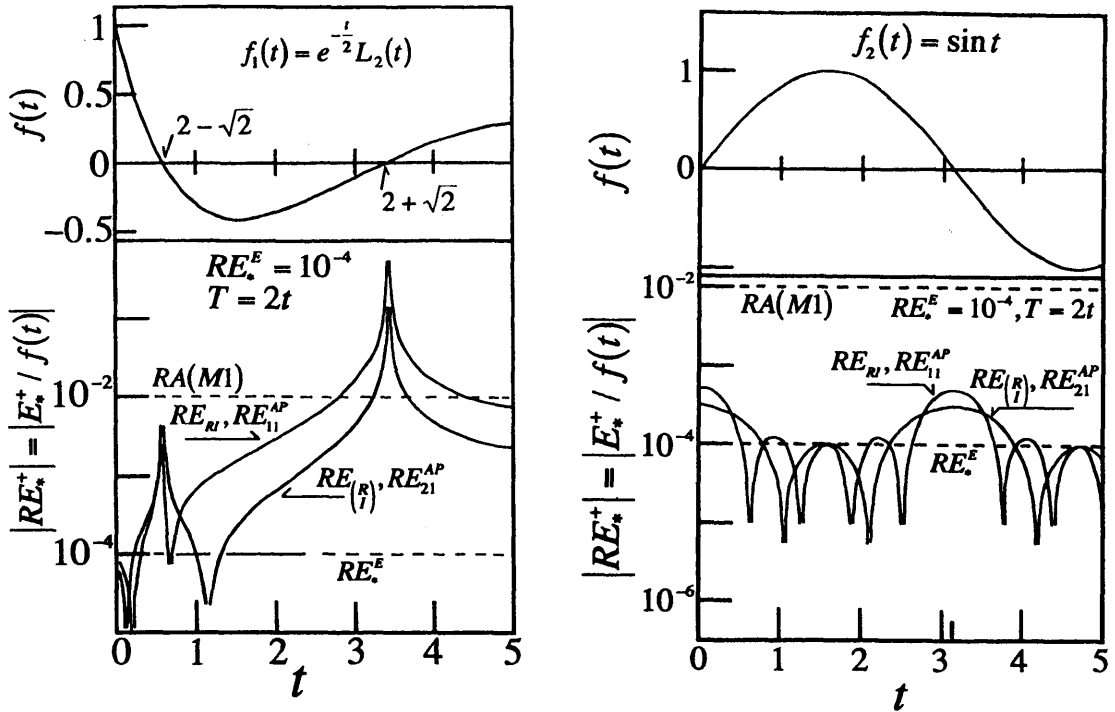
$$|E_{RI}|/f(t) \cong |E_1/f(t)| \cong e^{-2\Delta aT} = RE_1^E \quad (10.b)$$

のように、近似誤差の推定値 RE_1^E , RE_2^E が $F(s)$ を用いて定められる。逆に、要求精度 RA から式(10.a)(10.b)を用いて RE_1^E , RE_2^E を定めれば、 α_p は既知であるから、 a の値を設定出来る。しかし、この設定法は $f(t)$ に関する情報をほとんど含んでおらず、荒い方法である。

より正確な近似誤差の導出法として、著者等は先に E_2 について次式を示した⁽¹²⁾。

$$|E_2| = |f_R^* - f_I^*|/2 \quad (11)$$

この導出法は、 E_2 に関しては正しいものであるが、 E_1 は同様には求められず、また、非常に高い



(a) $f_1(t) = \exp(-t/2)L_2 = L^{-1}\{(s-1/2)^2/(s+1/2)^2\}$ (b) $f_2(t) = \sin t = L^{-1}\{1/s^2 + 1\}$

図1. 近似誤差と時刻 t の関係 ($T=2t$ とした場合)

Fig.1 Relation between t and theoretical approximation errors for $T=2t$.

要求精度に対しては式(11)の桁落ちが激しく実用的でない場合がある。

これらの欠点を持たず、且つ、高精度・高速な近似誤差の近似法を次に示す。今、 f_{R1} について、簡単のため $t=T/2$ とすると、打ち切り誤差を無視すれば、

$$\begin{aligned} f(t) &= f_{R1} - E_1 = f_{R1} - E_{11} - E_{12} - \dots \\ &= f_{R1}(a, t) - e^{-4at} f(5t) - e^{-8at} f(9t) - \dots \end{aligned} \quad (12)$$

となる。ここで、 $f(5t)$ も同様に、

$$f(5t) = f_{R1}(a', 5t) - e^{-20a't} f(25t) - \dots \quad (13)$$

と表せるから、 $a' \geq a/5$ と選べば、十分な精度で、

$$E_{R1} \cong E_{11} \cong e^{-4at} f_{R1}(a', 5t) = E_{11}^{AP} \quad (14)$$

と近似出来る。 $t \neq T/2$ の場合や、 E_{1n} 、 E_{2n} についても同様である。すなわち、 f_{R1}^M の近似式を用いて、 E_{1n} の近似値が $F(s)$ から直接十分な計算精度と f_{R1}^M と同程度の安定性で計算できる。

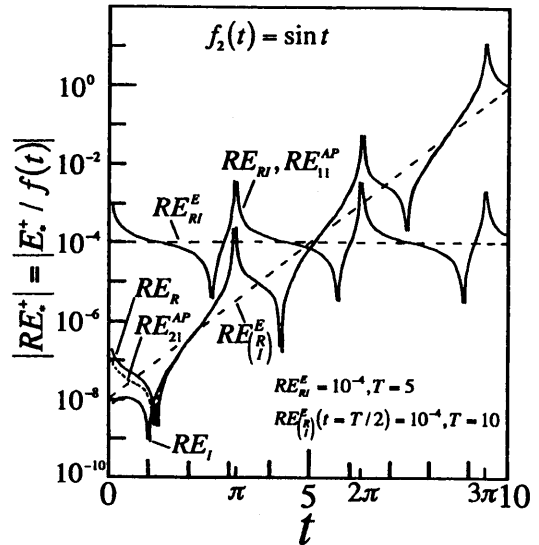
近似誤差の数値計算例を図1～2に示す。図1は、 $T=2t$ として三角関数の演算を省略し、 $RE_1^E = RE_2^E = 10^{-4}$ として式(11.a)(11.b)より各 t に対して積分路 a を定めた場合である。図1(a)は、直交変換された2次のラゲール関数 $f_1(t) = \exp(-t/2)L_2 = \exp(-t/2)(1-2t+t^2/2)$ $= L^{-1}\{(s-1/2)^2/(s+1/2)^2\}$ の場合、図1(b)は、 $f_2(t) = \sin t = L^{-1}\{1/s^2 + 1\}$ の場合である。図2は、 $f_2(t)$ について全領域で a と T を一定とした場合であって、 f_{R1} では $T=10$ 、 $RE_2^E(t=T/2=5)=10^{-4}$ から、 f_{R1} では、同様に $T=5$ 、 $RE_2^E(T=2t=5)=10^{-14}$ から a を定めたものである。

表1 $F(s)$ の次数 n と三つの
近似式の収束次数

収束次数	n'	
	even	odd
f_R	n	$n+1$
f_I	$n+1$	n
f_{RI}	n	n

図2. 近似誤差と時刻 t の関係 (a と T を固定した場合)

Fig.2 Relation between t and theoretical approximation errors for fixed a and T .



近似誤差の推定値と実際の値のずれは大きく、特に、表関数 $f(t)$ の包絡線が指数関数から外れている f_I の場合には甚だしい。特に大きく異なるのは、

$$f(t) \equiv 0, \text{ 且つ, } E_* \neq 0 \quad (15a)$$

$$f(t) \neq 0, \text{ 且つ, } E_* \equiv 0 \quad (15b)$$

の場合であることが分かる。大域的な特性は式(10.a) (10.b)の指数項に従っており、また、式(14)の手法による近似誤差の近似値は、 $E_1 \equiv E_2$ となる図2の $t \approx 0$ 近傍を除き、厳密値と非常に良く一致していることが分かる。

また、三つの近似式の近似誤差の差は、 $T=2t$ とした図1(a),(b)においては顕著でないのに対して、 a と T を固定した図2においては、 f_R 、 f_I と f_{RI} がまったく異なる性質を持つことが分かる。 a と T を一定とした計算法を用いる際には f_R 、 f_I と f_{RI} を区別して扱わねばならない。

3. 2 打ち切り誤差

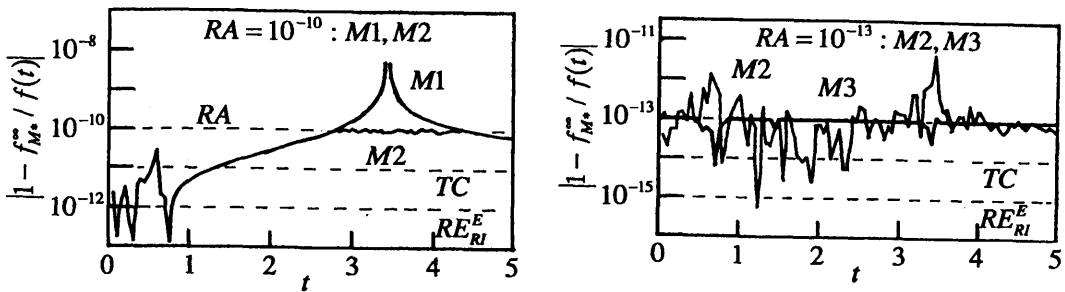
$F(s) \propto Cs^{-n}$ 、且つ、打ち切り誤差は、打ち切られた最初の項で評価出来ると考えて、大域的な特性を求める。 $|\cos \theta| \leq 1$ 、 $|\sin \theta| \leq 1$ 、かつ M が十分に大($M\pi/T \gg a$)さらに、 $|f(t)| \equiv Ae^{\rho t}$ とすれば、

$$|RE_*^{T,M}| = |E^{T,M}/f(t)| \equiv (2e^{\Delta a t}/AT)C(T/M\pi)^n \quad (16)$$

となる。表1に示されるように、 n' は f_i 間の収束の差を表わしており、これを収束次数と呼ぶ。打ち切り誤差は、 $\Delta a t \rightarrow$ 大、 $T \rightarrow$ 大で大きくなり、 $M \rightarrow$ 大で小さくなることが分かる。

図3は、 $t=T/2$ と固定し $f_1(t) = \exp(-t/2)L_2$ について、 f_i の計算精度、近似誤差、打ち切り誤差を示したものである。三つの近似式の間の差は顕著であり、 $n=1$ と奇数のため $n'=2$ となる f_R の打ち切り誤差が最も小さく、 M を2倍にすると打ち切り誤差は $0.3n'$ 桁小さくなっている。

図4は、 $f_3(t) = U(t) = L^{-1}(1/s)$ について、積分路 a 、 T と M を一定とした場合の t の変化に伴う打ち切り誤差の変化を示す。図3と同様に三つの近似式の差が現れており、さらに f_{RI} は $T < t < 2T$ において打ち切り誤差が特に大きいことが分かる。また、大域的には、式(16)で示され



(a) For medium required accuracy. (b) For high required accuracy.
 図6. 計算法1～3の計算精度 Fig.6 Numerical accuracy of METHOD 1,2 and 3.

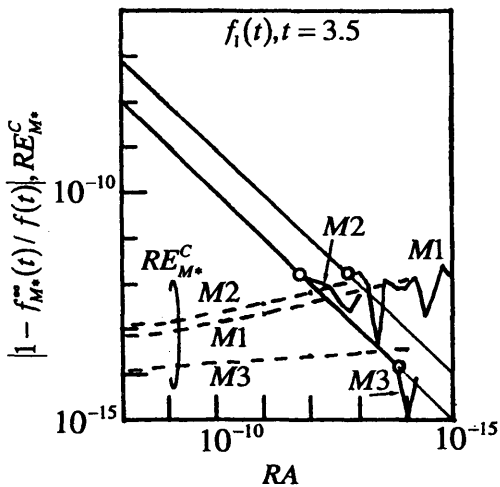


図7. 計算法1～3における要求精度と計算精度の関係
 Fig.7 Relation between required accuracy and numerical accuracy for METHOD 1,2 and 3.

図6(a)(b)は、実際に得られた計算精度を時刻 t の変化に対して示したものである。図6(a)は、要求精度 RA は 10^{-10} で、計算法1 (M1と表わす) と計算法2 (M2) の結果を示す。計算法1では、図1(a)からも予測できる様に、 $RA < |RE_{RI}|$ となって要求精度を満たせない領域が存在する。しかし、計算法2では、その領域で積分路の変更が行われているため、全領域で要求精度が満たされている。この場合には桁落ち誤差は小さいので計算法2と計算法3 (M3) は一致している。図6(b)は、 $RA = 10^{-13}$ と倍精度演算の有効桁の上限に近い高い計算精度を要求した場合である。計算法2では大きな桁落ち誤差のために計算精度の保証がまったくできない状態であるが、桁落ち誤差の小さい計算法3 (M3) では、特に条件の悪い $f(t) \approx 0$ 、

$t \approx 2 \pm \sqrt{2}$ の極く近傍を除き、要求精度を完全に満足している。計算法1も、当然計算法2と同様である。

図7は、近似誤差・桁落ち誤差共に大きい $t=3.5$ で要求誤差を変化させた場合の計算精度を示す。計算法1では要求精度が全領域で満たせず、積分路の補正を行う計算法2, 3を用いて初めて満たせること、桁落ちの影響のない最大精度 (○印) は、計算法1と計算法2では変わらないが、桁落ちの小さい計算法2では約2桁改善されていることが分かる。

このように、計算法2は近似誤差の時刻 t による変化に正しく追従する計算法であり、計算法3は、さらに桁落ち誤差を小さくする効果を持っている。逆変換に必要な計算時間の増加は大きくないため(付録参照)、常に計算法2を用い、桁落ち誤差の大きい場合のみ計算法3を用いるようにすれば、従来の手法と言える計算法1に比べて計算時間の増大のほとんどない高精度計算手法

$f_1(t) = \exp(-t/2)L_2$, $t=5$ について示す. 桁落ち誤差は $\Delta dt \rightarrow$ 大で増大するため, 同一の Δdt で近似誤差の小さい f_{Rl} が桁落ち誤差も格段に小さくこの点でも優れていることが分かる. 近似誤差と式(17)で求めた桁落ち誤差の推定値が交差する Δdt 付近で全誤差が増加しており, 式(17)の有効性を示している. また, $t=3.4142 \approx 2+\sqrt{2}$ における f_{Rl} も示されている. $f(t) \equiv 0$ のため, 桁落ち誤差, 近似誤差共に大きくなっている.

4. 数値計算法

本節では, 誤差解析の結果を基に, 非常に高い計算精度($RA > 10^{-7}$)が必要な場合に適した一時刻にたいする計算法と, 計算精度は普通($RA \approx 10^{-3}$)で多数の時刻の値が必要な場合に適したFFTを用いる計算手法を示す.

4. 1 1時刻に対する高精度計算法

1時刻に対して逆変換を行う場合には, 求める時刻 t 以外の $f(t)$ の振る舞いは全く不明であるから, 各誤差は相対誤差の意味で厳密に評価する必要がある. このため, 図1~2で明らかのように, 特に近似誤差を正確に知る, すなわち積分路を正しく設定する必要がある. 打ち切り誤差は, 個々の t に対して級数計算を行うのであるから収束判定により評価することができる. 桁落ち誤差については, 近似式として f_{Rl}^M を用いることによって減少させ, さらに式(17)で評価し確認する. f_{Rl}^M の数値計算は, 個々の t について, $t=T/2$ として三角関数の計算を省略し, さらに収束加速法を適用すればよく, このとき計算時間は他の二式とほとんど代わらない(付録参照).

以下に, 近似誤差の処理法の異なる三つの計算法を示す.

4. 1. 1 計算法1—近似誤差の推定値を用いる計算法—

要求精度 RA を用いて, 積分路と収束条件 TC を次のように定める.

$$RE_{Rl}^E \equiv RE_l^E = RA/100 \quad (18)$$

$$TC = RA/10 \quad (19)$$

ここで, 式(10.b)より,

$$a = a_p - (\ln RE_l^E)/2T \quad (20)$$

このようにした場合, 図1(a)(b)の例では要求精度は破線で示されている値となり, 零点を持つ非周期関数である $f_1(t) = \exp(-t/2)L_2$ では計算精度が不十分な領域があるが, 周期関数である $f_2(t) = \sin t$ では全領域で要求精度を満足できていることが分かる. 収束条件にも余裕を与えているが, これは局所的な収束を避けるためである. また, 桁落ち誤差を式(17)を用いて評価するため, 計算結果の有効桁数は保証できる.

この計算法は, 細野の手法⁽⁸⁾⁽⁹⁾と比較して, 近似式と項数の決定法が異なり, 桁落ち誤差の評価のある点で優っているが, 近似誤差の評価法は基本的に同一である. そして, 打ち切り誤差と桁落ち誤差の保証はあるが, 近似誤差に関しては, 推定の域を出ない.

4. 1. 2 計算法2—近似誤差を計算し積分路を定める計算法—

近似誤差の近似値は, 式(14)の手法で与えられ, その概算(order estimation)は, 収束条件を緩め, 且つ, f_{Rl} の桁落ちの小さいことを利用して単精度で行えば, $f(t)$ の高精度演算よりずっと短い時間で計算できる. (付録参照)

まず、要求精度 RA より、式(18)(20)に従って積分路の初期値 a_0 を求め、次に $f_{RI}''(a_0, t)$ と $E_{11}^{AP}(a_0)$ を、式(5c)(15)より $E_{11}^{AP}(a_0)$ と $f''(t) = f_{RI}''(a_0, t) - E_{11}^{AP}(a_0)$ が 2 桁程度の計算精度を持つような収束条件で計算し、 a_0 における近似誤差の相対値の相対値 $RE_{RI}(a_0)$ を求める。このとき、

$$RE_{RI}(a_0) \equiv RE_{11}(a_0) \equiv RE_{11}^{AP}(a_0) = \frac{E_{11}^{AP}(a_0)}{f''(t)} \equiv e^{-4a_0 t} \frac{f_{RI}''(a_0', 5t)}{f_{RI}''(a_0, t) - E_{11}^{AP}(a_0)} \quad (21)$$

となり、右辺の分数項は概算の意味では積分路に依存しない一定値と見なして良いから、式(21)は積分路と近似誤差の関係を与える近似式として用いることができる。

$|RE_{RI}(a_0)| > RA$ となった場合には、(21)式から導かれる次式を用いて積分路を変更すればよい。

$$a = -(1/4t) \ln \{ RA / |RE_{11}^{AP}(a_0)| \} + a_0 \quad (22)$$

さらに、 $f_{RI}(a, t)$ の計算における桁落ち誤差が大きく、要求精度を満たせない（有効桁が短い）場合には、つぎに述べる手法を用いるべきである。

4. 1. 3 計算法 3—逐次近似法—

ここでは、同一の精度（ビット長）の演算において、桁落ち誤差を減少させる手法を与える。図 5 から、積分路 $s = a$ が左にあるほど ($\Delta a' t \rightarrow$ 小) 桁落ち誤差は小さいことは明かである。また、式(14)の手法で近似誤差 E_n は高い計算精度で近似できるから、これを用いて近似誤差の第一項 E_{11} をも高精度で計算できる。この場合の近似誤差は第二項 E_{12} 以下となり、図 5 から分かるように積分路を左に移動させる事ができる。すなわち、

$$\begin{aligned} f(t) &\equiv f_{RI+1}''(a, t) - E_{12} - E_{13} - \dots \\ &= f_{RI+1}''(a, t) - e^{-8at} f_{RI}''(a, 9t) - \dots \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、

$$f_{RI+1}''(a, t) = f_{RI}''(a, t) - e^{-4at} f_{RI}''(a, 5t) \quad (24)$$

このとき近似誤差の推定値は、

$$RE_{RI+1}^E = e^{-8\Delta a' t} \quad (25)$$

となり、これを用いて積分路の初期値 a_0 を定めて、計算法 2 と同様に低い収束条件で $f(t)$ 、 $f(5t)$ 、 $f(9t)$ の近似値を計算する事によって、

$$\begin{aligned} RA &\geq |RE_{RI+1}(a)| \\ &\equiv RE_{12}(a) \\ &= \left| e^{-8at} f_{RI}''(a'', 9t) / f_{RI}''(a, t) - e^{-4at} f_{RI}''(a', 5t) - e^{-8at} f_{RI}''(a', 9t) \right| \end{aligned} \quad (26)$$

となるように積分路を定めることが出来る。これによって、桁落ち誤差を小さくし、同一精度の演算における最高精度を得ることができる。

4. 1. 4 数値計算例

計算法 1～3 による数値計算例を以下に示す。数値計算手法に次いては付録に示す。数値逆変換例に用いる関数は、直交化された 2 次のラゲール関数 $f_1(t) = \exp(-t/2) L_2$ である。この関数は、 $T = 2t$ の場合にも近似誤差の悪化を招く式(15a)(15b)の現象が現われ、且つ、 $F(s) \propto s^{-1}$ と収束次数が低く打ち切り誤差の点でも数値計算において高い計算精度を得ることが難しい関数である。

が実現できることが分かる。種々の変換対についても、同様の結果が得られている。

4. 2 多時刻一括高速計算法

多数の時刻 t_i ($i \sim N$) に対する逆変換を高速で求めるためには、各時刻に対する $F(s_{ij})$ の計算量と逆変換演算の量を減少させねばならない。ここでは、積分路 a および T を一定として $F(s_{ij})$ の計算量を減少させ、FFTアルゴリズムを利用して計算時間の短縮を図る計算手法を示す。

4. 2. 1 FFT法—FFTを用いる高速計算法

a と T を一定とすれば、3.1, 3.2節に示されたように、近似誤差と打ち切り誤差の傾向から、 $F(s)$ の次数 n によって、 f_R^M あるいは f_I^M を選択し共に定義域の半分を用いるのが適当である。

計算すべき時刻 t_i の数を N ($= 2^p$)、最大時刻を t_{\max} 、時刻の間隔を Δt とする。このとき、 $T = 2t_{\max} = 2N \cdot \Delta t$ 。

図3に示されるように、 T 、 M 一定の場合には a に最適点が存在し、且つ、 f_R^M 、 f_I^M では近似誤差・打ち切り誤差ともに、 $t \rightarrow T$ で大である。このことから、 $T = t_{\max}$ における a の最適点を計算に用いれば、 $0 < t < t_{\max}$ の範囲で計算精度は t_{\max} の点での誤差以下となることが期待できる⁽¹²⁾。

まず、積分路 a の設定法を示す。 $T = t_{\max}$ において要求精度 RA から式(10a)によって初期値 a_0 を定め、 $f_R^M(a_0, t_{\max})$ 、 E_s^{AP} 、 $E_s^{T \cdot M}$ ($M = 4N$) 用いて求める (ここでは、 $*$ = R or I)。これらの値と3.1, 3.2節に示された近似誤差・打ち切り誤差の a への依存性より、 $RA < |RE_s^{AP}| = |RE_s^{T \cdot M}|$ を満たす積分路 a を求めることが出来る。この a において、 $RA < |RE_s^{AP}| = |RE_s^{T \cdot M}|$ であれば M を2倍してこの手順を繰り返す。また、 $t = t_{\max}$ において近似誤差が特に大きくなる式(16a)(16b)が成り立つ場合には、この設定法は $0 < t < t_{\max}$ 全体に対しては不適当な a を与えてしまう。しかし、 $f(t)$ の広い範囲が出力されるためこの不都合は容易に評価できる。

次に、設定された a 、 M をもちいて、数値逆変換を行う。 f_R^M について示す。

$$f_R^M(\Delta t \cdot j) = (e^{at} / N \Delta t) \sum_{K=0}^{2N-1} X_K \cos(\pi k j / 2N) \quad (27)$$

ここで、

$$X_0 = \operatorname{Re}\{F(a)\} + 2 \sum_{p=1}^{M'} \operatorname{Re}\{F(a + i p \pi / 2 \Delta t)\}$$

$$X_1 = \sum_{p=0}^{M'} \left[\operatorname{Re}\{F(a + i(k + 4NP)\pi / 2N \Delta t)\} + \operatorname{Re}\{F(a + i(4N - k + 4NP)\pi / 2N \Delta t)\} \right]$$

ここで、 $M' = M/4N - 1$ である。 \sum'' は初項と終項を1/2倍して加えることを示す。 f_I^M も同様に求められる⁽¹³⁾。

式(27) \sum 記号内は、FFTアルゴリズムを用いたサイズ $2N$ の高速フーリエcosin逆変換を用いて計算する。結果として $2N$ 個 (全定義域) の答えが得られるが、 $0 < t < t_{\max}$ のみを用いる。

4. 2. 2 数値計算例

図8に $f_1(t) = \exp(-t/2)L_2$ の計算結果と近似誤差・打ち切り誤差の関係を全定義域について示す。 $0 < t < t_{\max}$ では打ち切り誤差が、 $t_{\max} < t < T$ では近似誤差が大きい。……○は、 $t = t_{\max}$ で a を定めたときの全誤差の値 (期待値と呼ぶ)、---●は $0 < t < t_{\max}$ の f_R^M の相対誤差の相乗平均値である。

図9は、図8と同じ変換対に対して、 $N=32, 128, 512$ とし、打ち切り項数 M を変化させた本節の手法 (FFT法) と要求精度 RA を変化させた前節の計算法1の、相対誤差の相乗平均値と計算時間の関係を示したものである。○印は、それぞれの手法の計算精度の期待値であって要求精度が 10^{-3} の場合について示してある。要求精度が低い場合には、FFT法が倍以上高速であるが、こ

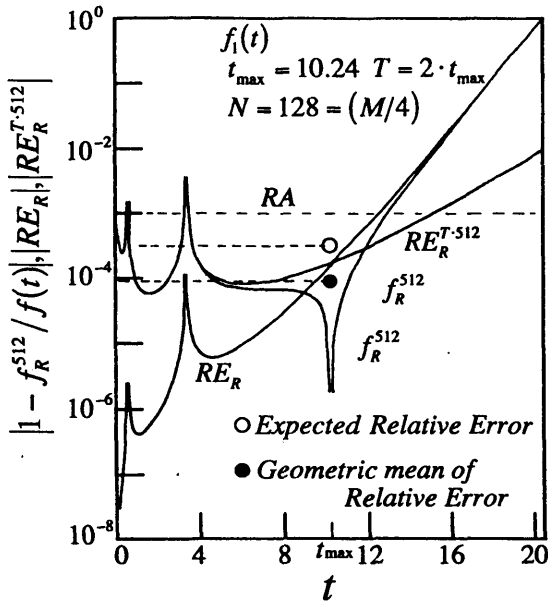


図8 FFT法の計算精度

Fig.8 Numerical accuracy of FFT method.

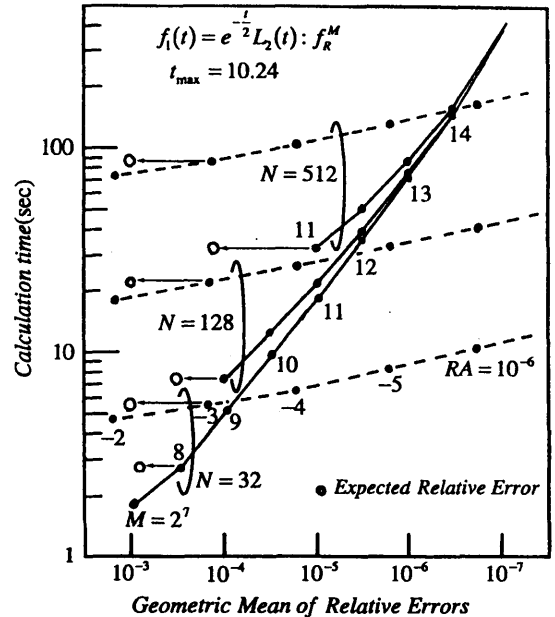


図9. FFT法と計算法1の計算精度と計算時間の比較

Fig.9 Comparison of numerical accuracy and calculation time by FFT method and METHOD 1.

の例では、 $F(s) \propto s^{-1}$ と収束が悪く打ち切り誤差が大きいため、要求精度が高くなると計算法1が早くなる。しかし、計算法1が早くなる計算精度は、 $N \rightarrow$ 大ほど高精度側となっている。また、計算法1が $F(s)$ の次数 n の値にあまり影響されないのに対して、FFT法は、 $n \rightarrow$ 大で急速に、計算精度・計算時間が改善される⁽¹²⁾。

5. まとめ

数値ラプラス逆変換の一手法である、フーリエ級数展開法について、三つの誤差、即ち、近似誤差、打ち切り誤差、桁落ち誤差の検討を行ない、その結果を用いて、一時刻に対する高精度計算法と多時刻に対する一括高速演算法を提案した。

特に、重要な結果は以下のようである。

- (1) 従来、詳細な検討の行なわれていなかった近似誤差と桁落ち誤差について、近似誤差に対しては $F(s)$ からの高精度な導出法を、桁落ち誤差に対しては演算過程での精度のよい推定法を与えたこと。
- (2) フーリエ展開法で与えられる三つの近似式について、各種の条件下における差異を検討し、それらを目的によって使い分ける必要のあることを見だし、一時刻に対する高精度計算法と多時刻一括計算法について、その選択法を明示したこと。
- (3) 一時刻に対しては、積分路を $F(s)$ から導出した近似誤差の近似値によって決定し、且つ、桁落ち誤差の推定値を計算することによって、従来の手法では不可能であった、出力値の計

算精度の保証を可能としたこと。

(4) 桁落ち誤差の影響を減少させるために、近似誤差の第一項をも高精度計算し、積分路を大幅に変更する逐次近似法を提案したこと。

(5) 多時刻に対する一括高速演算法に関しては、従来のFFTを用いる手法に、 $F(s)$ の次数による近似式の選択法と、積分路の決定法をより正確且つ高速とするための改良を行なったこと。

以上の様に、計算精度の制御と保証の可能な数値ラプラス逆変換手法を提案した。

今後の課題としては、桁落ち誤差の積分路依存性を明かにし、近似誤差・打ち切り誤差と共に制御を行なって計算機の有効桁を一杯に使う手法を見いだすこと、極端に大きい、あるいは、小さい t に関しても安定な解法を見いだすこと、多時刻一括計算法に関しては、FFTに換わる高速、且つ、安定な計算法を見いだすことなどが挙げられる。

謝辞

本研究の遂行に際し御理解と御激励をいただいた本学小林喬郎教授に感謝します。また、本研究に御協力をいただいた卒研生諸君に深謝します。

文献

- (1) C. Lanczos: "Applied Analysis", Prentice Hall(1956)
- (2) R. Bellman, R.E. Kalaba and J.O. Lockett "Numerical Inversion of the Laplace Transform", American Elsevier(1966)
- (3) K. Singhal and V. Vlach: "Computation of Time Domain Response by Numerical Inversion of the Laplace Transform", J. Franklin Inst., 299, 2, pp109-126 (Feb. 1975)
- (4) H. Dubner and J. Abate: "Numerical Inversion of Laplace Transforms by Relating Them to the Finite Fourier Cosine Transform". J. Assoc. Comput. Mach., 17, 1, pp.115-123 (Jan. 1968)
- (5) F. Durbin: "Numerical inversion of Laplace transforms: an efficient improvement to Dubner and Abate's method", Comput. J., 17, 4, pp.371-376 (Apr. 1974)
- (6) K.S. Curump: "Numerical Inversion of Transforms Using a Fourier Series Approximation", J. Assoc. Comput. Mach., 23, 1, pp.89-96 (Jan. 1976)
- (7) A. Ametani: "The Application of the Fast Fourier Transforms to Electrical Transient Phenomena", Int.J.Elec.Eng. Ed., 10, 4, pp.277-287 (Oct. 1972)
- (8) 細野敏夫: "数値ラプラス変換", 電学論(A), 99-A, 10, pp.494-500 (昭54-10)
- (9) 細野敏夫: "BASICによる高速ラプラス変換", 共立出版 (昭59)
- (10) R.M. Simon, M.T. Stroot and G.H. Weiss: "Numerical Inversion of Laplace Transforms with Application to Percentage Labeled Mitoses Experiments", Computers and Biomed. Res., 5, pp.598-607 (1972)
- (11) F. Veillon: "Numerical Inversion of Laplace Transform", Comm. Assoc. Comput. Mach., 17, 10, pp587-589 (Oct. 1974)
- (12) 大高, 松本: "FFTを用いた数値ラプラス逆変換の一手法", 信学論(C), J65-A, 6,

pp.585-586(昭57-06)

(13) IBM SL-MATH 解説書

(14) J. Abate and W. White: "The Fourier-series method for inverting transforms of probability distributions", Queueing System 10 (1992) 5-87

(15) 細野敏夫: "FILTの誤差解析と改良", 信学論(C-I), 投稿中

付録

A. 数値計算手法と計算時間

本論文の数値計算に用いた計算機は、TOSBAC-7/40であって、DOS-(II)fortranの倍精度演算の計算精度は15桁、単精度の場合は5桁である。

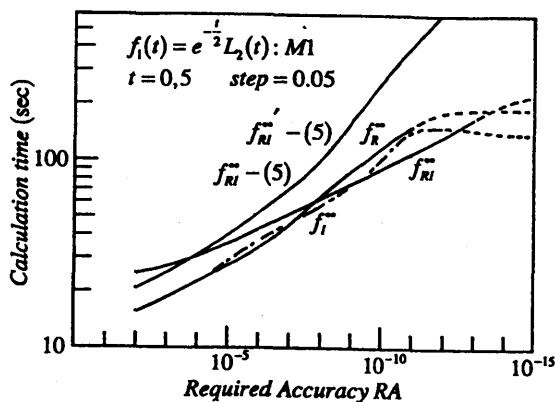
個別の t に対する計算法における収束加速法としては、 $F(s)$ がオイラー変換の条件を満たす場合には部分的にオイラー変換を適用する細野の方法が優れており⁽⁹⁾、 $F(s)$ がオイラー変換の条件を満たさない場合には ϵ アルゴリズム等を用いねばならない^{(7) (10) (11)}。

オイラー変換を用いる場合には、オイラー変換自体の次数も計算時間に大きく影響する。以下に示す図中で-(5)と付記されているものが5次、他は9次である。本論文では、収束条件の低い場合($TC \leq 10^{-3}$)と単精度の場合には5次を他は9次を用いている。

図A.1に f_R 、 f_I 、 f_{RI} の計算法1における計算時間を示す。関数は $f_1(t)$ 、時刻 t は、 $t=0.05 \sim 5$ で0.05キザミで100点の計算を行いその全計算時間を示している(図A.1,A.2も同じ)。破線部は桁落ち誤差の影響の有る領域を示す。 f_{RI} が十分に高速であることが分かる。

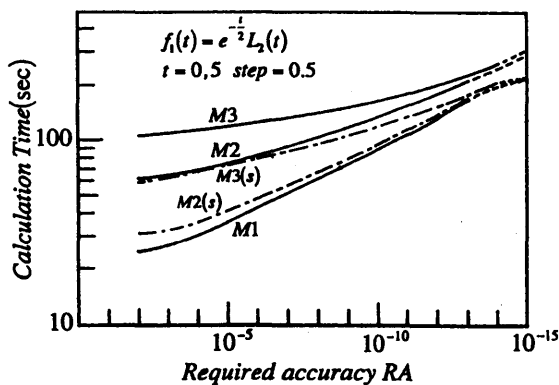
計算法2、3のパラメータ設定に用いる計算は、積分路と収束条件を独立に定めて行う。図A.2に、一方を固定した場合の計算時間を示す。計算時間は、収束条件に強く依存し、積分路の影響は弱いことがわかる。単精度演算を用いれば、計算時間はさらに短縮される。

図A.3は、 $f_1(t) = \exp(-t/2)L_2$ を $t=0.05 \sim 5$ で0.05キザミで計算した場合の計算法1～3の計算時間の比較である。(S)は、パラメータ設定を単精度で行った場合を示す。計算精度を保証できる計算法が十分高速で実現出来ることが分かる。



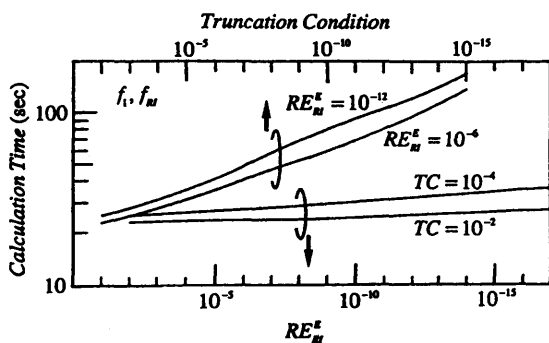
図A.1 三つの近似式の計算時間の比較
(計算法 1)

Fig.A.1 Comparison of calculation time
by three approximation equations.



図A.3 計算法 1 ~ 3 の計算時間の比較

Fig.A.3 Comparison of calculation times of
METHOD 1,2 and 3.



図A.2 積分路と収束条件の計算時間への影響

Fig.A.2 Calculation times for various contours of
integral and convergence conditions